

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ И СЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ В МАШИНОСТРОЕНИИ; НАНОМАТЕРИАЛЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОСИСТЕМЫ

УДК 681.586: 534.2, 541.16

Баркалин В.В., Ивкина О.М.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОЖИДКОСТНОГО ЭЛЕМЕНТА БИОСЕНСОРА В ПАКЕТЕ ANSYS CFX

Белорусский национальный технический университет
Минск, Беларусь

Одним из бурно развивающихся направлений микро- и нанотехники является разработка микрожидкостных устройств для систем «лаборатория на кристалле». Прецизионное моделирование работы таких систем является необходимой стадией их разработки. В данной работе описаны результаты моделирования элементов биосенсора с микрожидкостным элементом (рис. 1). Конструкция элемента бралась из [1]. Было промоделировано движение жидкости по капиллярам на участке гидравлического сопротивления (а) и клапана задержки (б). При введении в микрожидкостное устройство контролируемого раствора он проходит через петлеобразную микроструктуру каналов (рис. 1, а) для получения максимально равномерного расхода под действием капиллярных сил, создаваемых молекулярным насосом (рис. 1, d); затем через змеевидные капилляры (рис. 1, б), чтобы предотвратить засорение и формирование воздушных пузырей в канале. В середине этого участка сечение капилляра увеличено для создания резервуара для хранения реактива, после прохождения которого образец проходит через реакционную камеру (рис. 1, с), в которой производится оптическое сканирование образца [1].

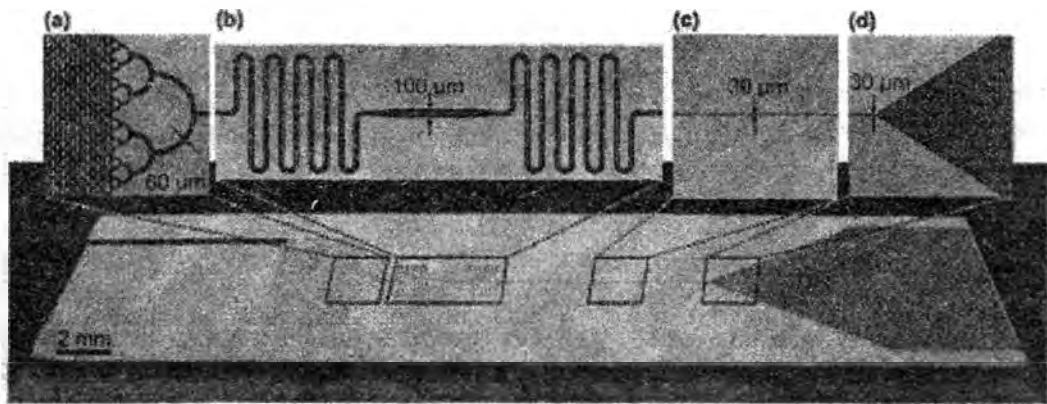


Рис. 1. Микрожидкостное устройство биосенсора [1].

Основной целью моделирования является изучение зависимости выходных гидродинамических параметров жидкости от скорости и давления на входе микрожидкостного канала. Для решения данной задачи используется метод конечных элементов. Для исследования течения используется модель несжимаемой весомой жидкости. Течение жидкости предполагается нестационарным и турбулентным. Для замыкания уравнений турбулентности течения жидкости используется RNG - модель турбулентности [2].

Двумерная математическая модель течения жидкости в продольном сечении капилляра (ось y направлена вдоль его главной оси) имеет вид:

$$\frac{\partial(\rho V_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho V_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho V_y V_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V_y V_y) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\mu_e \frac{\partial V_x}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_e \frac{\partial V_x}{\partial y}), \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho V_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho V_x V_y) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V_y V_y) = \rho g - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}(\mu_e \frac{\partial V_y}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_e \frac{\partial V_y}{\partial y}), \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho V_x k) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V_y k) = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_t \frac{\partial k}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_t \frac{\partial k}{\partial y}) + \mu_t \Phi - \rho \epsilon, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho V_x \epsilon) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V_y \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial y}) + C_{1\epsilon} \mu_t \frac{\epsilon}{k} \Phi - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}. \quad (5)$$

Здесь

$$\mu_e = \mu + \mu_t, \mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (6)$$

$$C_{1\epsilon} = 1,42 - \frac{\eta(1-\eta/4,38)}{1+0,12\eta^3}, \quad (7)$$

$$\eta = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{2(\frac{\partial V_x}{\partial x})^2 + 2(\frac{\partial V_y}{\partial y})^2 + (\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y})^2}, \quad (8)$$

$$\Phi = 2((\frac{\partial V_x}{\partial x})^2 + (\frac{\partial V_y}{\partial y})^2 + \frac{1}{2}(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y}))^2, \quad (9)$$

где ρ – заданная постоянная плотность жидкости, g – ускорение свободного падения, V_x, V_y – проекции вектора скорости жидкости, p – избыточное давление жидкости, μ – заданная физическая (ламинарная) вязкость, μ_t – турбулентная (вихревая) вязкость, μ_e – эффективная вязкость, k – кинетическая энергия турбулентности, ϵ – скорость диссипации кинетической энергии турбулентности, $C_\mu, C_2, \sigma_k, \sigma_\epsilon$ – эмпирические константы RNG- модели турбулентности, $C_\mu = 0,085, C_2 = 1,68, \sigma_k = \sigma_\epsilon = 0,72$.

Специфика задач гидродинамики течений со свободными границами заключается в задании граничных условий на неизвестной до решения задачи границе раздела сред: кинематического и динамического граничных условий. Если $F(t, x, y) = 0$ – уравнение свободной поверхности, то кинематическое граничное условие имеет вид

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(F V_x) + \frac{\partial}{\partial y}(F V_y) = 0. \quad (10)$$

Условие (10) означает, что частица жидкости, вышедшая на свободную поверхность, остается на ней во всем последующем движении. Динамическое граничное условие имеет вид

$$p = 0 \quad (11)$$

на границе $F(t, x, y) = 0$ и выражает непрерывность давления при переходе через свободную границу.

На неподвижных твердых стенках в каждый момент времени должны выполняться условия прилипания

$$V_x = 0, V_y = 0. \quad (12)$$

Границу s будем считать выходной и полагать, что на ней должны выполняться естественные условия Неймана

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} = 0, \frac{\partial V_y}{\partial y} = 0, \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (13)$$

Для выполнения трехмерного моделирования используется пакет ANSYS CFX. Течение жидкости нестационарно (стационарные задачи со свободными границами решаются в системе ANSYS только в нестационарной постановке): в задаче помимо граничных условий должны выставляться и начальные условия. Начальные условия примем тривиальными для V_x, V_y и p .

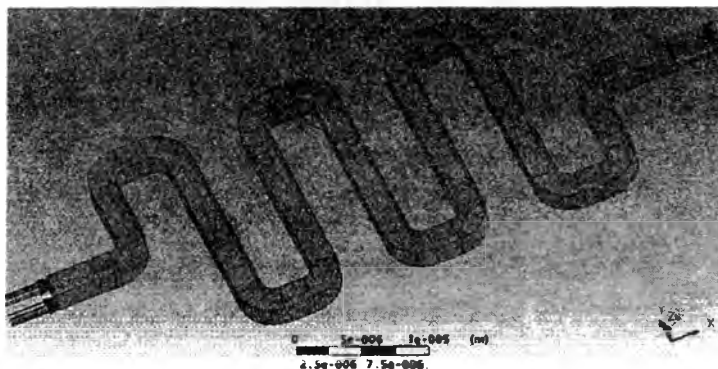


Рис. 2. Трехмерная модель участка гидродинамического сопротивления

При моделировании участка гидравлического сопротивления (рис. 2) ставилась задача определить параметры, которыми можно использовать для управления потоком жидкости в капилляре. По участку гидравлического сопротивления течет вода, плавучесть отсутствует, рассматривается установившийся процесс, перенос тепла отсутствует. На вход подается поток воздуха или воды, на выходе среднее статическое давление 1 атм, стенки капилляра гладкие и на них отсутствует проскальзывание, поток жидкости инфразвуковой.

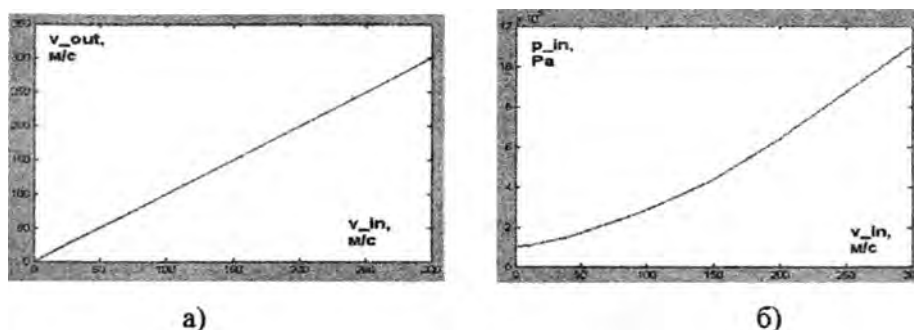


Рис. 3. а) зависимость выходной скорости от входной скорости (воздух) и б) зависимость входного давления от входной скорости (воздух)

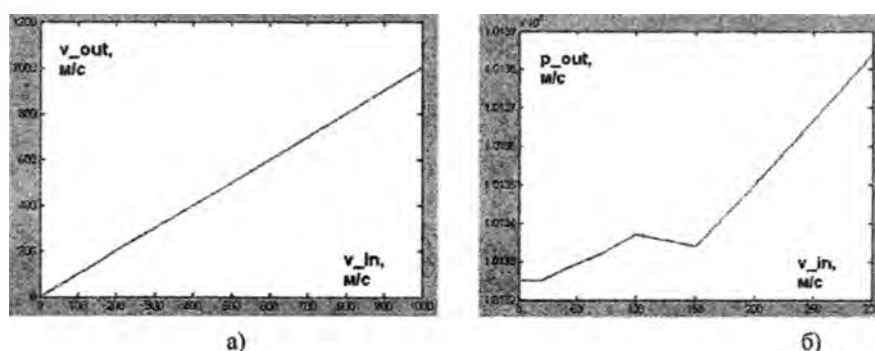


Рис. 4. а) зависимость выходного давления от входной скорости (воздух) и б) зависимость выходной скорости от входной скорости (вода)

Для анализа зависимости выходных параметров от входных изменяли значение скорости для воздуха и воды в диапазоне 1-300 м/с и 1-1000 м/с соответственно. По полученным данным построены графики зависимостей выходной скорости, входного давления и выходного давления от входной скорости для воды и воздуха (рис. 3-5).

Далее проводилось моделирование участка клапана задержки, который необходим в микрожидкостных структурах для получения необходимого капиллярного давления. Используются различные формы клапанов задержки, чтобы сделать более пологим фронт поступления жидкостей в капиллярных насосах, получить надежное поведение при заполнении канала и минимизировать риск попадания воздуха в канал.

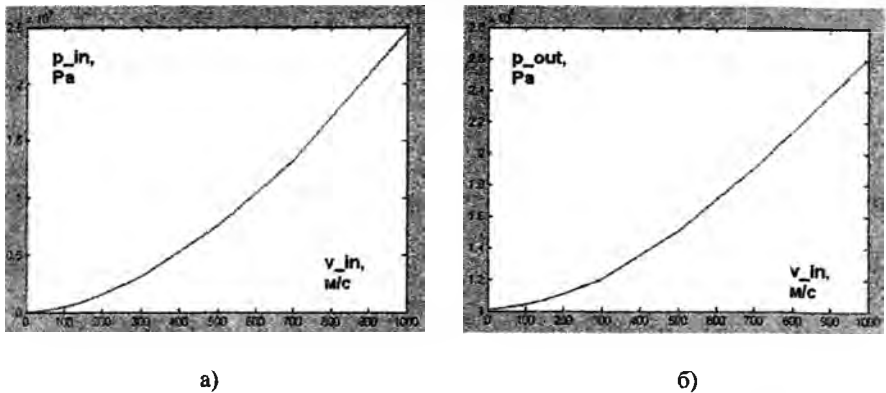


Рис. 5. а) – Зависимость входного давления от входной скорости (вода); б) – зависимость выходного давления от входной скорости (вода)

Моделирование позволило выяснить распределение потока по рукавам точек ветвления канала. При разделении потока на две ветви поток распределяется достаточно равномерно (рис. 6, а), в то время как при разделении на четыре ветви распределение становится неравномерным (рис. 6, б) и чувствительным к расчетной сетке.

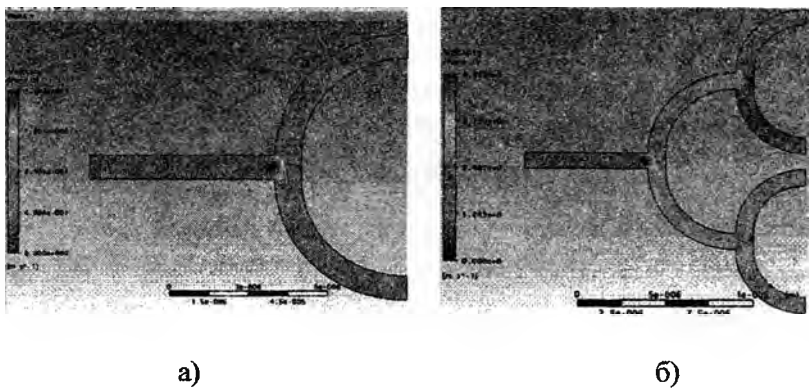


Рис. 6. Распределение потока в точках ветвления участка задержки устройства:
а) ветвление на два; б) на четыре рукава

В результате моделирования установлено, что управление скоростью и давлением жидкости на выходе микрожидкостного устройства можно посредством изменения давления на его входе. Особую трудность вызывает проектирование надежного участка задержки вследствие неустойчивости гидродинамического течения в ветвящейся системе каналов.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Gervais, E. Delamarche. Toward one-step point-of-care immunodiagnosics using capillary-driven microfluidics and PDMS substrates. // Lab Chip, 2009, N9, p.3330 – 3337. 2. Шабаров В.В. Применение системы ANSYS к решению гидрогазодинамических задач // Учебно-методический материал по программе повышения квалификации «Информационные системы в математике и механике». - Нижний Новгород, 2006, 108 с.